

## LA CARICA FORMALE

La carica formale CF è la carica assegnata a un atomo in una molecola o in uno ione poliatomico, assumendo che gli elettroni di legame siano equamente condivisi indipendentemente dall'elettronegatività di ciascun atomo. E' quindi diversa dal numero di ossidazione, che tiene conto delle elettronegatività degli atomi costituenti la molecola.

Nel caso che in una molecola o uno ione poliatomico possano essere possibili diverse geometrie, rappresentate da diverse strutture di Lewis, la carica formale è utile per stabilire quale fra queste strutture sia la più probabile.

La carica formale di un qualsiasi atomo in una molecola può essere calcolata con la seguente equazione:

$$CF = V - N - B$$

**V è il numero di elettroni di valenza dell'atomo isolato nello stato fondamentale**

**N è il numero degli elettroni di valenza di non legame dell'atomo nella molecola**

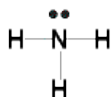
**B è il numero totale dei legami (coppia di elettroni)**

In una molecola neutra la CF complessiva deve essere uguale a zero, mentre in uno ione poliatomico la CF complessiva deve essere pari alla carica dello ione.

Ricordiamo che:

Il Boro ha 3 elettroni di valenza, il Carbonio ne ha 4, l'Azoto e il Fosforo ne hanno 5, l'Ossigeno e il Fosforo ne hanno 6, gli alogeni ne hanno 7.

1° esempio: Calcoliamo la CF degli atomi dell'ammoniaca, che essendo una molecola neutra dovrà avere CF totale = 0. La sua struttura di Lewis è rappresentata in figura:



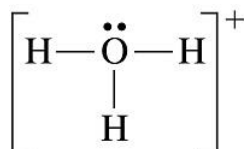
L'azoto ha 5 elettroni di valenza, 2 elettroni solitari e fa 3 legami, quindi:  $CF = 5 - 2 - 3 = 0$

L'idrogeno ha 1 elettrone di valenza, 0 elettroni solitari e fa 1 legame, quindi:  $CF = 1 - 0 - 1 = 0$

La struttura di Lewis da noi ipotizzata è corretta.

2° esempio: consideriamo lo ione  $\text{H}_3\text{O}^+$ , che essendo uno ione poliatomico dovrà avere CF totale = +1.

La sua struttura di Lewis è rappresentata in figura:

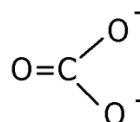


L'ossigeno ha 6 elettroni di valenza, 2 elettroni solitari e fa 3 legami, quindi  $CF = 6 - 2 - 3 = +1$

CF dell'idrogeno =  $1 - 0 - 1 = 0$  (vedi sopra)

La carica formale dello ione poliatomico è quindi +1, che coincide con la carica dello ione poliatomico: la struttura di Lewis da noi ipotizzata è corretta.

3° esempio: molecola  $\text{CO}_3^{2-}$  Dovrà avere CF totale = -2



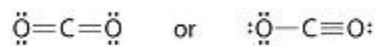
$$\text{CF del carbonio} = 4 - 0 - 4 = 0$$

$$\text{CF dell'ossigeno legato con doppio legame al carbonio} = 6 - 4 - 2 = 0$$

$$\text{CF di ognuno dei due atomi di ossigeno legati con legame singolo} = 6 - 6 - 1 = -1$$

La carica formale dello ione poliatomico è quindi:  $-1 + (-1) = -2$ , che coincide con la carica della molecola, quindi la struttura di Lewis da noi ipotizzata è corretta.

3° esempio: per la molecola di  $\text{CO}_2$  le possibili strutture di Lewis sono due:



Per identificare quale delle due strutture sia più rappresentativa calcoliamo per entrambe la carica formale:

Per la prima struttura:

$$\text{CF dell'ossigeno} = 6 - 4 - 2 = 0$$

$$\text{CF del carbonio} = 4 - 0 - 4 = 0$$

Per la seconda struttura:

$$\text{CF dell'ossigeno a sinistra} = 6 - 6 - 1 = -1$$

$$\text{CF dell'ossigeno a destra} = 6 - 2 - 3 = +1$$

$$\text{CF del carbonio} = 4 - 0 - 4 = 0$$

Si noti che la CF in entrambe le strutture è pari a zero, a conferma che  $\text{CO}_2$  è una molecola neutra.

Ma quale delle 2 strutture sarà la più probabile?

La prima struttura è simmetrica, quindi più stabile, ed inoltre nella seconda struttura uno dei 2 atomi di ossigeno, molto più elettronegativo del carbonio, avrebbe  $\text{CF} = +1$ , mentre il carbonio avrebbe  $\text{CF} = 0$ . Quindi la seconda struttura non è corretta.

*F. Perin*